

---

# Modélisation et simulation avec la méthode Density Functional Tight Binding

Fernand Spiegelman<sup>\*1</sup>, Mathias Rapacioli, Aude Simon, Jérôme Cuny, Leo Dontot, Luis Fernando Oliveira, Christophe Iftner, and Kseniia Korchagina

<sup>1</sup>Laboratoire de Chimie et Physique Quantiques (LCPQ/IRSAMC) – Université Paul Sabatier (UPS) - Toulouse III, CNRS : UMR5626 – 118 Route de Narbonne Bât. 3R1 b4 Toulouse 31062 Toulouse cedex 9, France

## Résumé

Intermédiaire entre les méthodes quantiques ab initio et les méthodes de champs de force, l'approche Tight-Binding fondée sur la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFTB) offre une alternative quantique approchée séduisante pour la simulation des propriétés électroniques et la dynamique de systèmes moléculaires complexes et des agrégats, tant pour la dimension des systèmes accessibles que pour le caractère intensif et l'ergodicité des simulations. Après une brève introduction sur l'approche DFTB, l'objectif de cette présentation est (i) de montrer les possibilités actuelles de ce type de modélisation et de ses extensions pour l'étude de la structure électronique: précision attendue, traitement de très grands systèmes moléculaires ou agrégats (~1 million d'atomes), traitement des interactions faibles (forces de polarisation, forces de Van der Waals), extensions hybrides DFTB-Interaction de Configurations (DFTB-CI), traitement de certains états excités, développement de descriptions mixtes quantique-champ de forces (DFTB-FF), (ii) d'illustrer son couplage "en-vol" avec des méthodes de simulation intensives pour l'optimisation globale ou l'étude des propriétés à température finie: dynamique moléculaire classique et/ou Monte Carlo, algorithmes Parallel Tempering, Métadynamique, et même Dynamique Moléculaire Quantique (méthode des intégrales de chemins). Les illustrations concerneront le calcul des propriétés structurales, dynamiques, spectroscopiques et thermodynamiques de complexes moléculaires, agrégats, molécules d'intérêt biologique, espèces moléculaires piégées sur agrégat ou en matrice.

**Mots-Clés:** modélisation, simulation, Density Functional Tight Binding, grands systèmes moléculaires

---

<sup>\*</sup>Intervenant